ЛЕКЦИЯ #09
НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ- 8
ВЫСШИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ – 2
АЛЬТЕРНАТИВЫ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

TEST #04

§ 9.1 Многофотонная ионизация: простая оценка скорости

◆ При рассмотрении переходов в непрерывный спектр с помощью первого порядка теории возмущений в § 3.2 было установлено, что такие резонансные переходы возможны, если энергия фотона $\hbar\omega$ превосходит энергию связи электрона в начальном состоянии: $E_k = E_n + \hbar\omega > 0$. Если это условие не выполнено, то скорость переходов в первом порядке теории возмущений равна нулю, и для описания процесса фотоионизации надо использовать высшие порядки теории возмущений. Начнем со второго порядка. Если $a_m(t)$ - амплитуды состояний дискретного спектра, то вероятность перехода в одно из состояний ν непрерывного спектра дается формулой

$$W_\nu(t) = \left| \frac{1}{\hbar} \sum_m \int_{-\infty}^{t} V_{\nu m}(t') a_m(t') e^{i\omega_{\nu m} t'} dt' \right|^2 \qquad (1)$$

Поскольку однофотонного перехода в непрерывный спектр нет, амплитудой начального состояния $a_n \approx 1$ можно пренебречь. Для амплитуд других состояний дискретного спектра $a_m(t)$ можно использовать выражения, найденные выше (в § 2.3) по теории возмущений. Поскольку основной вклад в амплитуды состояний, лежащих по энергии выше начального, дает компонента возмущения с отрицательной частотой (см. § 3.2), сохраним только ее, положив $\hat{V}(t) = \hat{V}e^{-i\omega t}/2$. Тогда в первом порядке теории возмущений имеем

$$a_m^{(1)}(t) = -\frac{V_{mn}}{2\hbar} \cdot \frac{e^{i(\omega_{mn} - \omega)t}}{\omega_{mn} - \omega}, \qquad (2)$$

Здесь подразумевается, что $\omega_{kn} > 0$, где $|n\rangle$ - начальное состояние. Подстановка (11) в (10) дает выражение для вероятности перехода во втором порядке:

$$W_{n\nu}^{(2)}(t) = \left| \frac{1}{\hbar} \sum_m \int_{-\infty}^{t} \frac{V_{\nu m} V_{mn}}{4\hbar(\omega_{mn} - \omega)} e^{i(\omega_{\nu n} - 2\omega)t'} dt' \right|^2 \qquad (3)$$

Зависимость от времени всех членов в сумме одинакова. Определим *составной матричный элемент* второго порядка соотношением

$$\widetilde{V}^{(2)}_{\nu n} = \sum_m \frac{V_{\nu m} V_{mn}}{4\hbar(\omega_{mn} - \omega)} \tag{4}$$

Тогда можно придать формуле для вероятности перехода вид

$$W^{(2)}_{n\nu}(t) = \frac{\left|\widetilde{V}^{(2)}_{\nu n}\right|^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{t} e^{-i2\omega t' + i\omega_{\nu n} t'} dt' \right|^2 \tag{5}$$

Это выражение отличается от найденного ранее (в § 3.2) для случая однофотонной ионизации только обозначениями. Если состояние с энергией $E_k = E_n + 2\hbar\omega$ принадлежит непрерывному спектру, то из (5) сразу следует ответ: скорость двухфотонной ионизации определяется выражением

$$\dot{W}^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \widetilde{V}^{(2)}_{n\vec{k}} \right|^2 \rho(E_k). \tag{6}$$

Оно представляет обобщение золотого правила Ферми на второй порядок теории возмущений.

◆ Из определения составного матричного элемента (4) следует оценка

$$\widetilde{V}^{(2)}_{n\nu} \sim \frac{\widetilde{\Omega}}{\widetilde{\Delta}} V_{n\nu} \approx \beta V_{n\nu}. \tag{7}$$

Она легко обобщается на расчет в высших порядках теории возмущений: $\widetilde{V}^{(K)}_{n\nu} \sim \beta^{K-1} V_{n\nu}$. Скорость K-фотонной ионизации можно оценить так:

$$\boxed{\dot{W}^{(K)} \sim \beta^{2(K-1)} \dot{W}^{(1)}} \tag{8}$$

где $\dot{W}^{(1)}$ - скорость однофотонной ионизации полем частоты $K\omega$. Оценка (8) правильно передает зависимость скорости ионизации от интенсивности поля, но требует деликатного подхода к оценке параметра β.

★ **Пример.** Рассмотрим ионизацию атома натрия излучением стандартного лазера. Потенциал ионизации в этом случае равен $\hbar\omega_I = 5.14$ *эВ* $= 4.42\hbar\omega_s$, и для перехода в непрерывный спектр необходимо поглощение 5 фотонов. Если, как то мы делали раньше, взять в качестве матричного элемента дипольного момента перехода величину $d_s = ea_0$, а эффективную расстройку оценить частотой излучения, $\widetilde{\Delta} = \omega_s$, то из формулы (8) получим $\dot{W}^{(5)} \approx 7.8 \cdot 10^{-17}\, c^{-1}$. Количественные расчеты дают для этих условий значение $\dot{W}^{(5)} \approx 8.2 \cdot 10^{-10}\, c^{-1}$, на семь порядков большее.

◆ При оценке величины составного матричного элемента высокого порядка следует учесть увеличение матричных элементов переходов между возбужденными состояниями и уменьшение расстроек, связанное со сгущением уровней в атомных спектрах вблизи границы континуума. В итоге параметр теории возмущений $\beta = \widetilde{\Omega}/\widetilde{\Delta}$ может стать гораздо больше принятого нами значения $\beta_s = ea_0\mathcal{E}/\hbar\omega_s$.

◆ В экспериментах по многофотонной ионизации мишень представляет собой атомный пучок с плотностью атомов $n \le 10^{12}\,см^{-3}$ и поперечным сечением $D \le 1\,см$. Поперечник лазерного луча в фокусе $d \approx 10^{-2}\,см$, а глубина области фокусировки $l \sim 10d \approx 10^{-1}\,см$. Таким образом, одновременно действию излучения подвергается $N \approx nd^2 l \approx 10^7$ атомов. Детектор регистрирует лишь часть ($\eta \approx 10^{-2}$) вылетевших электронов. Поэтому эксперименты должны проводиться при условиях, когда вероятность W ионизации атома под действием импульса длительностью τ, $W = \dot{W}\tau$, велика в сравнении с $(N\eta)^{-1}$ (регистрируются фотоэлектроны) и мала в сравнении с единицей (нет насыщения). Середине этого диапазона, $W = (N\eta)^{-1/2}$, для атомов Na при $\tau \approx 10^{-8}\,см$ соответствует интенсивность $I_{\exp} = 820 I_s = 8.3 \cdot 10^{10}\,Вт\,см^{-2}$. Уместен вопрос: применима ли при таких интенсивностях теория возмущений? Даже стандартная оценка параметра теории возмущений дает в этом случае $\beta_s = 0.035$, а сверх того надо учесть и перечисленные в предыдущем пункте факторы. Мы вернемся к обсуждению этих вопросов при рассмотрении альтернативных теорий ионизации атома в поле сильной электромагнитной волны. А пока декларируем результат:

> Существует область значений интенсивности, в которой наблюдаемая фотоионизация атомов может быть описана теорией возмущений. Скорость ионизации оказывается пропорциональной интенсивности излучения, взятой в степени, равной числу фотонов, необходимому для перевода системы из начального состояния в непрерывный спектр. Однако граница применимости теории возмущений недалека от экспериментального окна.

§ 9.2 Альтернативы теории возмущений

◆ Все предыдущие расчеты эволюции квантовой системы в состоянии $|n\rangle$ под действием гармонического поля $\hat{V}(t) = \hat{V}\cos\omega t$ основывались на формуле первого порядка теории возмущений для амплитуд, полученной в § 2.3:

$$a_m(t) = -\frac{V_{mn}}{\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}}{\omega_{mn}-\omega} + \frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t}}{\omega_{mn}+\omega}\right]. \tag{9}$$

Это выражение применимо до тех пор, пока все описываемые им амплитуды $a_m(t)$ малы.

◆ Такое условие заведомо не выполняется в случае *изолированного резонанса*, когда $\omega \to \omega_{mn}$ только для одного состояния $|m\rangle$. Изолированный резонанс возможен в любой системе с неэквидистантным спектром при сколь угодно малом возмущении. Если при этом для всех остальных состояний $|k\rangle \neq |m\rangle, |n\rangle$, выполнено условие малости амплитуд, $|a_k(t)| \ll 1$, то для описания поведения системы в резонансном поле вводится модель *двухуровневой системы*, учитывающая амплитуды только двух состояний системы $\hat{H}_0$, связанных резонансным переходом.

◆ Особый случай представляет модель *гармонического осциллятора.* В силу эквидистантности спектра для нее резонансными становятся одновременно переходы между всеми соседними уровнями, и двухуровневое приближение неприменимо. Эта модель должна быть рассмотрена отдельно.

◆ Рассмотрим модель *слабо ангармонического осциллятора*, спектр которого имеет вид

$$E_n = \hbar\omega_v\left(n - \frac{\kappa}{2}n^2\right) \tag{10}$$

где $\kappa \ll 1$ - параметр нелинейности. Если система находится в состоянии $|n\rangle$ и внешнее поле находится в точном резонансе с частотой $\omega_u = \omega_{n+1,n}$ перехода в состояние $|n+1\rangle$, то амплитуда перехода в другое соседнее состояние $|n-1\rangle$ будет мала при условии малости параметра

$$\beta_r = \frac{\Omega}{\kappa\omega_v}, \tag{11}$$

где Ω - частота Раби. Если $\beta_r \geq 1$, то модель двухуровневой системы теряет применимость: при этом условии возмущение находится в резонансе со многими переходами. Такую ситуацию называют *квантовым нелинейным резонансом.* Если при этом выполняется неравенство

$$\beta_+ = \frac{\Omega}{\omega} \ll 1, \tag{12}$$

то эффективно приближение вращающегося поля, в котором в операторе возмущения учитываются только резонансные частотные компоненты:

$$V_{mn}\cos\omega t \to \frac{1}{2}V_{mn}\exp\left[-i\left(\mathrm{sign}\,\omega_{mn}\right)\omega t\right] \tag{13}$$

Так строится модель для описания квантового нелинейного резонанса в приближении вращающегося поля. Мы будем называть ее моделью *многоуровневого резонанса*.

◆ Наконец, если $\beta_+ \geq 1$, то теряет применимость приближение вращающегося поля. В этой области "нормальные" (поглощение фотона приводит к увеличению энергии системы) и "аномальные" (поглощение фотона приводит к уменьшению энергии системы) процессы одинаково эффективны. Область $\beta_+ \geq 1$ назовем областью *сильного поля.*

★ Модель ангармонического осциллятора эффективна для квазиклассических систем. Положим $\omega_v = 0.041\omega_s = 7.26\cdot10^{13}\,c^{-1}$, $d = ea_0 = 2.54\ Дб$, $\kappa = 10^{-2}$ - параметры, типичные для двухатомных молекул. Тогда порог многоуровневого резонанса $\beta_r = 1$ достигается в резонансном поле амплитуды $\mathcal{E}_r = 300\ Гс$ с интенсивностью $I_r = 1.1\cdot10^{7}\ Вт\,см^{-2}$, а порог сильного поля $\beta_+ = 1$ - при амплитуде $\mathcal{E}_+ = 3\cdot10^{4}\,Гс$, что соответствует интенсивности $I_+ = 1.1\cdot10^{11}\ Вт\ см^{-2}$. Таким образом, все четыре случая – пертурбативный, резонансный двухуровневый, резонансный многоуровневый и случай сильного поля – лежат в области значений интенсивности, доступных современному эксперименту.

EOL ☯